

# СТРУКТУРА И СВОЙСТВА ОКСИДОВ ОБРАЗУЮЩИХСЯ НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТИТА ИТТРИЯ СОСТАВА $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$

Визнер А.С.\*, Брюзгина А.В., Урусова А.С.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

\*E-mail: [nastyavizner1998@gmail.com](mailto:nastyavizner1998@gmail.com)

## STRUCTURE AND PROPERTIES OF OXIDES FORMED ON THE BASIS COBALTITE YTTERIUM OF $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$

Vizner A.S.\*, Bryuzgina A.V., Urusova A.S.

Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The objects of the present study are yttrium  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$  doped on the A sublattice of cobaltite. At present, it has been established that at 900°C in all studied oxides of composition  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$  in the range of compositions  $0.0 \leq x \leq 0.2$  with a step of 0.05 in the temperature range of 400–900° C in air, the phase of yttrium cobaltite is formed as the main one. The content of impurity phases in the sample of composition  $Y_{0.8}Ca_{0.2}CoO_3$  does not exceed 10%.

Кобальтит иттрия  $YCoO_{3-\delta}$  и твердые растворы на его основе характеризуются удовлетворительной чувствительностью, селективностью, скоростью протекания реакции и стабильностью по отношению к CO и NO<sub>x</sub> [1].

На данный момент известно, что введение щелочноземельного металла в подрешетку иттрия в кобальтите иттрия  $YCoO_{3-\delta}$  приводит к образованию сложных оксидов с общей формулой  $Y_{1-x}Me_xCoO_{3-\delta}$ , где Me = Ca, Sr, Ba.

Но поскольку данные о описанных в литературе составах противоречивы, то уточнение информации об оптимальных методах синтеза, кристаллической структуры, физико-химических свойствах и их взаимосвязи является актуальной задачей. Объектами настоящего исследования являются кобальтиты иттрия, допированные по А-подрешетке кальцием.

Для определения возможности замещения иттрия на кальций с образованием твердого раствора была приготовлена серия образцов  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$ , в интервале составов  $0.0 \leq x \leq 0.2$  с шагом 0.05. Отжиг образцов проводили при температуре 400–900°C на воздухе.

Исследуемые образцы были синтезированы по глицерин-нитратной технологии. Для синтеза использовали оксид иттрия  $Y_2O_3$  (ИтО-В), карбонат кальция  $CaCO_3$  (ос.ч.) и металлический кобальт. Растворение образцов проводили в азотной кислоте  $HNO_3$  (квалификация ч.д.а.) с использованием лимонной кислоты (квалификация ч.д.а.) в качестве органического прекурсора. Металлический кобальт получали восстановлением из его оксида при 650°C в токе водорода.

Определение фазового состава образцов проводили при комнатной температуре с использованием дифрактометра Shimadzu XRD -7000 в  $Cu_{K\alpha}$ -излучении.

Структурные параметры были уточнены профильным методом Rietveld с использованием пакета Fullprof.

На данный момент установлено, что при 900°C во всех исследуемых оксидах состава  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$  с  $0 \leq x \leq 0.2$  фаза кобальтита иттрия образуется как основная. Содержание примесных фаз в образце состава  $Y_{0.8}Ca_{0.2}CoO_3$  не превышает 10 %.

Дифрактограммы однофазных образцов полученных при 900°C  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$  с  $0 \leq x < 0.15$  были проиндексированы в рамках орторомбической ячейки, пространственной группы *Pbnt*.

При введении кальция в подрешетку иттрия в  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$  наблюдается монотонное увеличение параметров и объема ячеек твердых растворов  $Y_{1-x}Ca_xCoO_{3-\delta}$ , что объясняется размерным эффектом [2].

1. Addabbo T. , Bertocci F. et al., Proc. Engineer. 87, 1095–1098 (2014).
2. Shannon R.D. Acta Crystallographica. 32, 751–767 (1976).